7. Д. С. Талецкий, Д. С. Малышев О деревьях ограниченной степени с максимальным количеством наибольших независимых множеств // Дискретный анализ и исследование операций. — 2018. — Т. 25, вып. 2. — С. 101–123.
8. Д. С. Талецкий, Д. С. Малышев Деревья без листьев-дубликатов с наименьшим количеством максимальных независимых множеств // Дискретная математика. — 2018. — Т. 30, вып. 4. — С. 115–133.
9. Н. А. Кузьмин О деревьях радиуса 2 с максимальным количеством паросочетаний // Журнал СВМО. — 2020. — Т. 22, вып. 2. — С. 177–187.

DOI: 10.20948/dms-2022-57

О СВЯЗНЫХ СУБКУБИЧЕСКИХ ГРАФАХ С N ВЕРШИНАМИ И $N+3$ РЕБРАМИ, ИМЕЮЩИХ НАИБОЛЬШЕЕ ЧИСЛО ПАРОСОЧЕТАНИЙ

Н. А. Кузьмин, Д. С. Малышев (Нижний Новгород)

Химические соединения часто рассматриваются в форме молекулярных графов, где атомам соответствуют вершины графа, а связям между ними — ребра графа. При этом свойства соединений описываются в терминах так называемых топологических индексов, которые представляют собой некоторые инварианты графов относительно переобозначения вершин.

В работе [1] японского химика Харуо Хосойи был предложен топологический индекс, называемый теперь индексом Хосойи. Паросочетанием графа называется любое множество попарно несмежных его ребер. Индекс Хосойи графа определяется как количество его паросочетаний. В работе [1] было показано, что некоторые физико-химические свойства алканов (в частности, их точки кипения) связаны со значением индекса Хосойи их молекулярных графов. Впоследствии обнаружилась связь индекса Хосойи с другими физико-химическими свойствами алканов, а также с энергией сопряженных π-электронных систем, см. обзоры [2–4].

Поскольку топологические индексы определяют ту или иную энергию химических соединений, то интересна задача по выявлению графов из заданных классов с экстремальным (минимальным или максимальным) значением того или иного топологического индекса. В данной работе рассматриваются только обыкновенные графы, т.е. неориентированные, непомеченные графы без петель и кратных ребер.

Связный граф, имеющий n вершин и m ребер, будем называть (n, m)-графом. В работе [5] было доказано, что среди $(n, n-1)$-графов максимальный индекс Хосойи имеет только n-путь. В работе [6] было показано, что среди (n, n)-графов максимальный индекс Хосойи имеет только n-цикл. В статье [7] рассматривались $(n, n+1)$-графы и там было доказано, что при $n \geq 9$ среди $(n, n+1)$-графов максимальный индекс Хосойи имеет только результат соединения ребром 4-цикла и $(n-4)$-цикла. Отметим, что случай $(n, n+1)$-графов рассматривался в более ранней работе [8], но в [8] был получен результат с ошибочным ответом.

В [7] рассматривался еще и случай $(n, n+2)$-графов. В ней доказывается, что при $n \geq 15$ единственный оптимальный граф получается соединением ребрами двух 4-циклов с последовательными вершинами $(n-8)$-цикла. Аналогичный результат (другим, новым и более комбинаторным методом) был получен в [9] при $n \geq 17$. Можно было ожидать, что для $(n, n+3)$-графов оптимальный граф будет являться результатом соединения ребрами трех 4-циклов с последовательными вершинами $(n-12)$-цикла. Оказалось, что это не так уже для субкубических графов, т.е. графов со степенями всех вершин не более чем 3. А именно, справедливо следующее утверждение:

Теорема. *Для всех $n \geq 18$ экстремальный граф единственен и получается соединением двумя ребрами одного из концов $(n-16)$-пути с вершинами двух 4-циклов и аналогичным соединением другого конца этого пути с другими двумя 4-циклами.*

Способ доказательства теоремы использует метод, предложенный в [9]. А именно, сначала устанавливается, что каждый максимальный субкубический $(n, n+3)$-граф не содержит листьев, затем перечисляются все стяжки субкубических $(n, n+3)$-графов без листьев, которых оказалось ровно 17 штук. Псевдограф G' называется стяжкой обыкновенного графа G, если G получается подразбиениями ребер G' и G' содержит минимальное количество вершин. В [9] был предложен некоторый способ для построения локальных преобразований графов, увеличивающих индекс Хосойи. Предложенные конкретные преобразования для субкубических $(n, n+3)$-графов позволяют выявить стяжки именно максимальных графов и настроить параметры (т.е. количества подразбиений ребер) в них. Они сохраняют количества вершин и ребер, а также связность и субкубичность графов.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, проект номер 21-11-00194.

Список литературы

1. Hosoya H. Topological index. A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons // Bulletin of the Chemical Society of Japan. — 1971. — Vol. 44. — P. 2332–2339.

2. Hosoya H. The topological index Z before and after 1971 // Internet Electronic Journal of Molecular Design. — 2002. — Vol. 1. — P. 428–442.

3. Hosoya H. Important mathematical structures of the topological index Z for tree graphs // Journal of Chemical Information and Modeling. — 2007. — Vol. 47. — P. 744–750.

4. Hosoya H. Mathematical meaning and importance of the topological index Z // Croatica Chemica Acta. — 2007. — Vol. 80. — P. 239–249.

5. Gutman I. Acyclic systems with extremal Huckel π-electron energy // Theoretical Chemistry Accounts. — 1977. — Vol. 45. — P. 79–87.

6. Ou J. On extremal unicyclic molecular graphs with maximal Hosoya index // Discrete Applied Mathematics. — 2009. — Vol. 157. — P. 391–397.

7. Liu Y., Zhuang W., Liang Z. Largest Hosoya index and smallest Merrifeld–Simmons index in tricyclic graphs // MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry. — 2015. — Vol. 73. — P. 195–224.

8. Deng H. The largest Hosoya index of $(n, n+1)$-graphs // Computers and Mathematics with Applications. — 2008. — Vol. 56. — P. 2499–2506.

9. Кузьмин Н. А., Малышев Д. С. Новое доказательство результата о полном описании $(n, n+2)$-графов с максимальным значением индекса Хосойи // Математические заметки. — 2022. — Т. 111, № 2. — С. 258–276.

DOI: 10.20948/dms-2022-58